

AIが拓く科学研究の未来

～AI for Scienceの進展と可能性、今後の課題～

株式会社日本総合研究所 先端技術ラボ

2026年8月17日

＜本資料に関するお問い合わせ＞

執筆者：先端技術ラボ 垣渕 太成 近藤 浩史 伊藤 蓮 稲田 龍人

本レポートに関するお問い合わせにつきましては、当社ホームページの[問い合わせフォーム](#)よりご連絡ください。

- 本資料は作成日時点で弊社が一般に信頼できるとされる資料に基づいて作成されたものですが、情報の正確性・完全性を保証するものではありません。本資料の内容は、経済情勢などの変化により変更されることがあります。本資料の情報に起因して閲覧者及び第三者に損害が生じた場合も、執筆者、取材先及び弊社は一切責任を負いかねます。
- 本資料の著作権は株式会社日本総合研究所に帰属します。本資料の一部または全部を、電子的または機械的な手段を問わず、無断で複製または転送などを行うことを禁止しています。

はじめに

AIを活用して科学研究を高度化し、科学的発見を加速する「AI for Science」に注目が集まっている。AIの知識・推論能力が向上する中、AIを科学研究の各プロセスに活用することで、研究の効率化とともに、従来は解明が困難だった課題に迫ることが期待されている。

こうした可能性を背景に、主要AI企業による科学研究への参入や、各国による支援が進んでいる。OpenAIやAnthropicなどの生成AIを開発する企業はAIを活用した科学的発見や研究支援に関する取り組みを相次いで進めている。各国でも、計算資源の確保や学術データの統合、研究基盤の整備を通じてAI for Scienceを後押しする動きが広がっている。

AI for Scienceは科学研究の進め方をどのように変え、どの分野から実装が進み、社会や産業にどのような影響をもたらし得るのか。また、AIによる発見を実際の研究成果や社会実装へつなげるためには、どのような課題を乗り越える必要があるのか。本資料では、AI for Scienceの進展状況と先行事例を整理し、その可能性と限界を考察する。

【目次】

章	内容	ページ
AI for Scienceの全体像	AI for Scienceとは AIが変える科学研究のプロセス 注目される背景 主要AI開発企業のAI for Science戦略	P.4 P.5 P.6 P.7
AI for Scienceの進展と事例	AI for Scienceの分類 科学タスク特化型AI AIによる研究支援 AIによる研究活動の自律化（自律化が進む分野とその事例）	P.8 P.9 P.10 P.11-17
AI for Scienceを支える基盤と課題	AIの研究能力に残る課題 研究環境の整備 研究成果の社会実装に向けて AI for Science推進に向けた各国の取り組み	P.18 P.19 P.20 P.21
AI for Scienceの未来	人間の研究者の重要な役割 AI for Scienceが変える科学的発見の未来	P.22 P.23

エグゼクティブサマリ

1	AI for Scienceとは	- AI for Scienceとは、AIを科学研究に活用し、科学的発見を加速する取り組みである - 従来から、予測・シミュレーション・探索・設計を高度化するAIの開発が行われてきた - 生成AIにより、文献調査、仮説検討、実験設計、結果解析など研究活動全体への利用が広がっている - 今後は、AIが実験装置や解析ツールを操作し、仮説と検証を自律的に反復する方向へ発展していく
2	企業・政府による推進	- 主要AI企業は、科学者の採用や研究向けAIサービスの提供を通じて科学的発見の加速に取り組んでいる - 例えばOpenAIは、2028年3月までに研究活動の相当部分を自動化するAI研究者の実現を目指している - AIがコード生成やモデル評価を担うことで、AIそのものの研究開発も自動化されつつある - 各国政府は、AI for Scienceを重要ミッションと考え、計算資源、研究データ、実験設備、研究機関を結ぶ基盤整備を進めている
3	分野と研究事例	- 数学や物理学では、証明探索や理論の検討にAIを活用し、新たな研究成果につながる事例が現れている - 化学、材料科学、創薬、生命科学では、候補探索、設計、実験、解析の自律化が先行している - AIによる自律化は、多数の候補を生成・評価し有望な対象を絞りこむ研究初期段階で有効である - 一方、安全性・耐久性の検証や臨床試験など、実用化に必要な工程はAIによる自律化が難しい
4	課題と考察	- AIによって仮説や論文を大量に生成できるため、低品質な研究成果が増える可能性がある - AIが提示した発見候補には、再現できないものや、安全性が確認されていないものも含まれる - 危険な化学、生物、サイバー分野への応用に備え、主要AI企業はモデルの能力を評価し、リスク水準に応じてAIの開発・公開・提供に安全対策や制限を設けている - 人間の研究者には、研究課題の設定、結果の解釈と意味づけ、再現性や安全性の確認が引き続き求められる

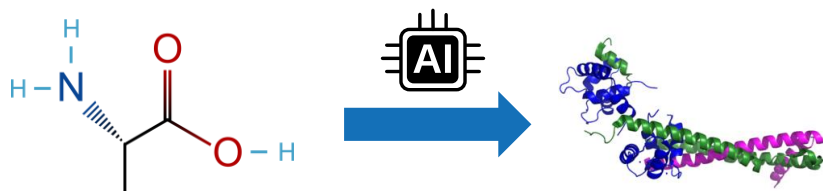
AI for Scienceの全体像

AI for Scienceとは

- AI for Scienceとは、AIを科学研究に活用する取り組みである。
- AIは、科学的現象の予測・解明、研究作業の効率化、仮説と検証の反復など、科学研究の幅広い場面で活用が進んでいる。

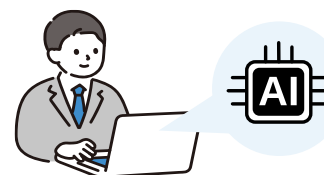
科学研究におけるAIの役割

科学的現象の予測



- 科学的現象を学習したAIモデルを作成し、予測・解明に役立てる

研究作業の支援



-  文献・データの調査
-  科学的考察・相談
-  データ解析・可視化
-  論文・レポートの作成

- LLM（大規模言語モデル）によって研究活動を効率化。科学的専門性の高い考察も可能

仮説と検証の自律的な反復



- 人間の指示を待たずに仮説と検証を反復し、発見を加速

AI for Scienceの全体像

AIが変える科学研究のプロセス

- 研究現場ではAIの利用が急速に拡大し、研究者の間でも、AIが今後の研究分野を大きく変革するとの期待が高まっている。
- 今後は情報検索やデータ解析などの支援にとどまらず、仮説の検討や実験・検証の設計など、科学的発見のプロセスへの能動的・自律的な関与が期待される。

研究コミュニティでの受容

研究現場でAIの利用が急速に拡大

2025年8～9月に、世界113ヶ国の研究者・研究責任者3,234人を対象に実施した調査では、**58%が仕事でAIを使用**しており、主な用途は、最新研究の検索・要約（61%）、研究データ解析（38%）、論文・報告書の下書き（38%）など(*1)。

研究者の約7割が、AIによる研究分野の変革を予想

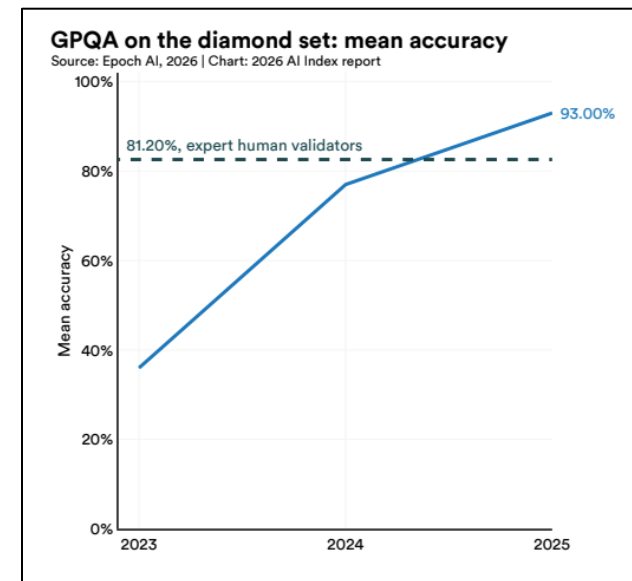
2024年6月にMax Planck SocietyとFraunhofer Societyの研究者を対象とした調査では、6,215人のうち、**69.2%が「AIによって今後10年間に自らの研究分野が変革、または革命的に変化する」と予想した**(*2)。

*1 Elsevier, "Researcher of the Future: A Confidence in Research Report," 2025, <https://www.elsevier.com/insights/confidence-in-research/researcher-of-the-future> 2025年11月4日公開（2026年8月7日アクセス）

*2 Max Planck Institute for Innovation and Competition / Fraunhofer, "Who uses AI in research, and for what? Large-scale survey evidence from Germany," 2025, <https://www.ip.mpg.de/en/research/research-news/ai-in-research.html> 2025年11月27日公開（2026年8月7日アクセス）

AIの進歩

- LLMの性能は近年飛躍的に進歩している。コード生成・文献調査に加え、科学分野の専門的知識・推論能力が研究者を超えつつある。



[画像出所] Stanford HAI, "AI Index Report 2026, Chapter 2: Technical Performance," Figure 2.4.2, https://hai.stanford.edu/assets/files/ai_index_report_2026_chapter_2_technical.pdf 2026年4月13日公開（2026年8月7日アクセス）

- GPQA Diamond: 生物・物理・化学の大学院レベルの高難度科学Q&Aベンチマーク
- 2025年時点の最新モデルは専門家の正解率（81.2%）を上回っている（93.0%）



AI for Scienceの全体像

注目される背景

- AI for Scienceは科学的発見のプロセスに能動的・自律的に関与する新たな研究パラダイムとして注目を集めている
- 各国政府もAI for Scienceを重要テーマと位置づけ、研究基盤の整備を進めている。

科学研究のパラダイムシフト

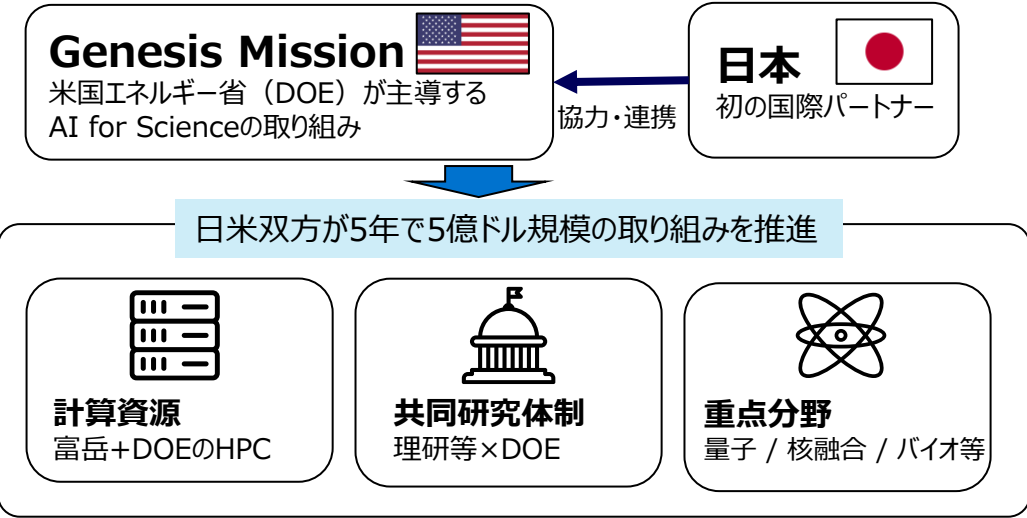
従来、科学研究は人間が仮説を構築し、人手で実験・観測・検証を重ねることで進められてきた。今後は、**仮説の検討や実験・検証の設計にAIを活用する場面が広がっていく**。さらにAIは、研究プロセスに能動的・自律的に関与し、科学者の「共同研究者」としての役割を担っていくと考えられる。

パラダイム	概要
1. 実験的観察	自然現象の観察・実験を通じて経験的に知識を蓄積する
2. 理論的演繹	実験をもとに得られた知見から法則性を見出し、数理モデルや理論を構築する
3. 計算科学 (シミュレーション)	手動での計算が困難なモデルや理論をコンピュータで検証・シミュレーションする
4. データ駆動型	収集したデータを解析することで新たな知見やパターンを発見する
5. AI for Science	AIがより能動的にまたは自律的に科学的発見のプロセスに関与する

Tony Hey, Stewart Tansley, Kristin Tolle, "The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery," Microsoft Research, 2009年公開, <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/fourth-paradigm-data-intensive-scientific-discovery/> (2026年6月24日アクセス) を元に日本総研作成

政府による後押し

- 各国がAI for Scienceを重要テーマと位置づけ、共通データ基盤・計算資源・共通AIモデルなどの整備を推進 (→P.21)
- 日本でも重要なテーマに位置づけられる
 - ・ 文部科学省「**AI for Scienceの推進に向けた 基本的な戦略方針**」
 - ・ AIを活用した研究を普及する目的で、AI for Science萌芽の挑戦研究創出事業 (SPReAD) において**AI活用研究の公募**が2026年4月に開始され、同年6月には採択課題が公表された。
 - ・ 米国**Genesis Mission**との連携を発表



文部科学省, "日本のAI for Scienceの取組と米国の「ジェネシス・ミッション」との連携に向けた日米戦略的パートナーシップについて," https://www.mext.go.jp/a_menu/kagaku/kokusai/kyoryoku/mext_00015.html, 2026年6月4日公開 (2026年6月23日アクセス) ; U.S. Department of Energy, "United States and Japan Announce Historic \$1 Billion Partnership Under President Trump's Genesis Mission," <https://www.energy.gov/articles/united-states-and-japan-announce-historic-1-billion-partnership-under-president-trumps>, 2026年6月4日公開 (2026年6月23日アクセス) を元に日本総研作成

AI for Scienceの全体像

主要AI開発企業のAI for Science戦略

- 前述のように、生成AIの開発をリードする3社は、科学的研究にAIを活用し人類の可能性を広げることをミッションに掲げている。
- 研究者へのAI提供や、研究者の採用、実験プロセスへの適用、研究推進目的のAI開発などを通じてAI for Scienceに取り組む。

Anthropic

*研究者へのAI提供

研究計画の科学的価値、研究チームの専門性・AI活用能力を評価し、選定した研究者にClaude APIの無償クレジットを提供(*1)。特に生命科学分野を重点対象とする。

Claude Science Projects

最大50件の研究プロジェクトに対し、1件当たり最大3万ドル相当のClaudeクレジットを提供(*2)。実際の研究への適用を通じて、Claude Science（後述）の有用性や科学研究における新たな活用方法を検証する。初期段階では、生物学・生物医学研究を重点対象とする。

研究者の募集

生命科学、実験生物学、計算生物学などの研究者・研究エンジニアを採用(*3)。専門研究者を社内に置き、科学分野におけるモデルの開発・評価や、AIを用いた研究手法の検証を進める。

*1 Anthropic, "Introducing Anthropic's AI for Science Program," <https://www.anthropic.com/news/ai-for-science-program>, 2025年5月5日公開, (2026年8月10日アクセス)

*2 Anthropic, "Claude Science, an AI workbench for scientists, is now available," <https://www.anthropic.com/news/claude-science-ai-workbench> 2026年6月30日公開, (2026年8月10日アクセス)

*3 Anthropic, "Join our team," <https://www.anthropic.com/careers/jobs> (2026年7月16日アクセス)

Google

科学タスク特化型AIの開発

生成AIの本格普及以前から、AlphaFoldや、GNoMEなど、個別の科学課題に特化したAI（→P.9）を開発・公開し、科学研究の進展に貢献してきた。

社内の科学研究体制

Google DeepMindとGoogle Researchに、生命科学、医学、材料、気象、物理、数学などの専門研究者とAI研究者を配置(*4)。科学者とAI研究者の協働を通じて、科学AIの開発を進めている。

研究支援AIへの展開

2025年にGoogle AI Co-Scientistを発表し、実際の生命科学研究で仮説生成と実験検証を実施(*5)。さらに、仮説生成、計算実験、文献調査などを支援する「Gemini for Science」へ展開し、研究プロセス全体の支援を進めている(*6)。

*4 Google Research, "Applied science,"

<https://research.google/teams/applied-science/> (2026年7月30日アクセス)

*5 Google, "Google Research launches new scientific research tool, AI co-scientist," <https://blog.google/technology/ai/google-research-ai-co-scientist/>, 2025年2月19日公開, (2026年7月30日アクセス)

*6 Pushmeet Kohli, Yossi Matias, "Gemini for Science: AIの実験とツールで新たな発見の時代を切り拓く," Google, <https://blog.google/intl/ja-jp/company-news/technology/gemini-for-science-io-2026/> 2026年5月20日公開, (2026年7月30日アクセス)

OpenAI

研究者へのAI提供

科学・数学・工学分野の研究者にChatGPT、Codex、GPT-5.6等を無償提供する**ChatGPT for Academic Researchers**を開始(*7)。文献調査、仮説生成、データ解析、コード作成、論文執筆など、研究プロセス全体でのAI活用を支援。2027年までに10万人への提供を予定している。

実験プロセスへの適用

生命科学企業と連携し、GPT-5の提案を実験で検証し、その結果に基づいて次の実験条件を更新する研究を実施(*8)。分子クローニングやタンパク質合成の効率化など、AIと実験を接続した閉ループ型研究を進めている。

OpenAI for Science

2026年9月までにインターンレベルのAI研究アシスタント、2028年3月までに研究活動の相当部分を自動化するAI研究者の実現を目指している(*9)。AIが2026年に小さな発見を、2028年に中～大規模な発見を行うことを目標としている(*10)。

*7 OpenAI, "Accelerating scientific discovery with ChatGPT for Academic Researchers," <https://openai.com/index/chatgpt-for-academic-researchers/2026> 年7月29日公開, (2026年8月10日アクセス)

*8 OpenAI, "Measuring AI's capability to accelerate biological research in the wet lab," <https://openai.com/index/accelerating-biological-research-in-the-wet-lab/2025> 年12月16日公開, (2026年8月10日アクセス)

*9 OpenAI, "Built to benefit everyone: our plan," <https://openai.com/index/built-to-benefit-everyone-our-plan/> 2026年6月8日公開, (2026年8月10日アクセス)

*10 OpenAI, "AI progress and recommendations," <https://openai.com/index/ai-progress-and-recommendations/> 2025年11月6日公開, (2026年8月10日アクセス)

AI for Scienceの進展と事例

AI for Scienceの分類

- AIの活用範囲は、科学タスク特化型AIから、生成AIによる文献調査・仮説生成・実験計画・解析・論文執筆などの研究支援へ広がり、さらに各工程を連結することで研究プロセス全体の自動化・自律化へ進展している。
- 以後本資料では、科学タスク特化型AI→AIによる研究支援→AIによる研究活動の自律化の順で説明する。

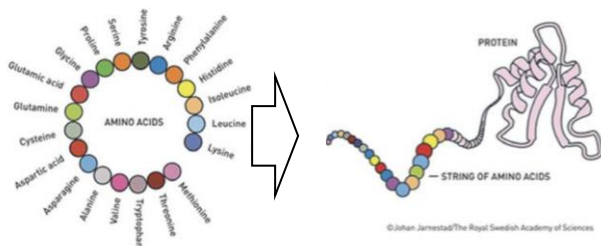
活動範囲・自律度が拡大

科学タスク特化型AI

- 個別の科学課題を高精度に予測・探索する
 - 例: AlphaFold, GNoME
- 目的・目標に応じて専門家がモデルを設計し、データを用いて学習する

AlphaFold

配列からタンパク質の立体構造を予測するモデル



[画像出所] NobelPrize.org, "The Nobel Prize in Chemistry 2024 - Popular information," Figure 1, <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/popular-information/> 2024年10月9日公開 (2026年8月12日アクセス)

AIによる研究支援

- 研究プロセスの一部をAIが支援・実行し、研究活動を効率化
- 文献調査、論文執筆などから活用が広がり、近年では高度な科学的知識・推論能力を活かし研究課題の設定や仮説生成にも利用されている

研究プロセス	主なAIの用途
情報収集	● 文献・データ収集 ● 論文・図表理解 ● 関連知識の整理・統合
仮説生成	● パターンや関係の発見 ● 予想・仮説・候補の生成
検証方法の設計	● 実験・シミュレーションの計画 ● 評価方法・指標の設定
検証・結果解釈	● 証明、実験の実行 ● データ解析、結果の解釈
論文執筆	● 論文執筆、図表作成、校正 ● 査読、妥当性・重要性の評価

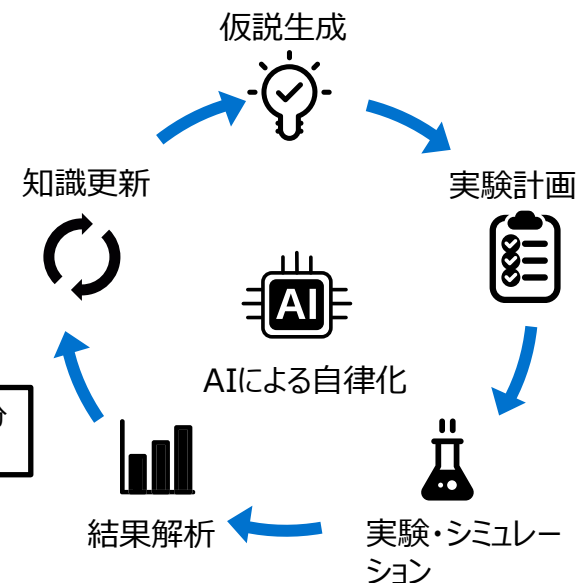
科学的発見
の中核



中核部分
の拡大

AIによる研究活動の自律化

- 複数の研究工程を自律的につなぎ、結果に応じて研究サイクルを反復するAI
- 実験を人間が担うものから、ロボットと接続し、自動実験を含むサイクルを構築するものまで、自律化の程度には幅がある



AI for Scienceの進展と事例

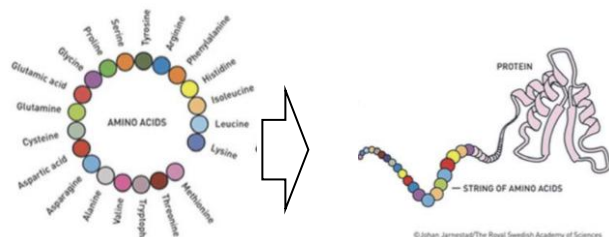
科学タスク特化型AI

- 科学分野では、対象となる現象や構造をデータから学習するAIモデルが作られ、予測・探索・設計などに活用されている。
- 生体分子、材料、地球環境、量子系などの複雑な対象・現象を計算機上でモデル化し、構造・性質・将来変化の予測や新たな候補の発見を可能にする。

生命科学

AlphaFold

タンパク質・生体分子の立体構造を予測。2024年ノーベル化学賞

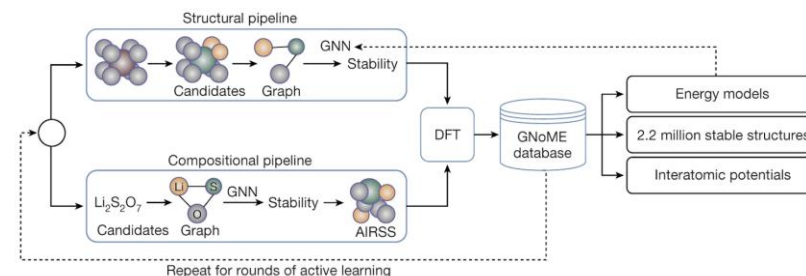


[画像出所] NobelPrize.org, "The Nobel Prize in Chemistry 2024 - Popular information," Figure 1, <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/popular-information/> 2024年10月9日公開 (2026年8月12日アクセス)

化学・材料

GNoME

結晶構造の安定性を予測し、新たな無機材料候補を大規模に探索

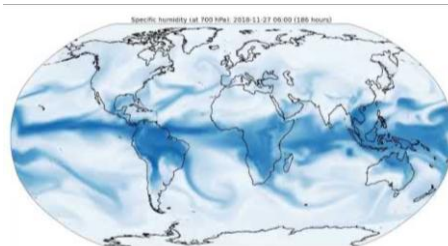


[画像出所] Merchant et al., "Scaling deep learning for materials discovery", <https://www.nature.com/articles/s41586-023-06735-9>, Fig. 1a 2023年11月29日公開 (2026年8月12日アクセス)

気象・地球科学

GraphCast

地球の大気状態をモデル化し、気象を高速に予測

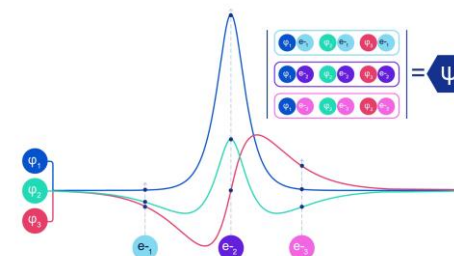


[画像出所] Google DeepMind, "GraphCast: AI model for faster and more accurate global weather forecasting", <https://deepmind.google/blog/graphcast-ai-model-for-faster-and-more-accurate-global-weather-forecasting/>, 2023年11月14日公開 (2026年8月12日アクセス)

物理・数理

FermiNet

電子の相互作用をAIでモデル化し、原子や分子の安定な状態とエネルギーを計算。



[画像出所] Google DeepMind, "FermiNet: Quantum physics and chemistry from first principles", <https://deepmind.google/blog/ferminet-quantum-physics-and-chemistry-from-first-principles/>, 2020年10月19日公開 (2026年8月12日アクセス)

AI for Scienceの進展と事例

AIによる研究支援

- AIの知識・推論能力は、文献調査や文章作成にとどまらず、**数理的導出、仮説検討、実験計画など、研究の中核工程を支援できる水準に達し**、具体的な活用実績も生まれている。
- さらに、データ解析やグラフ生成、研究ツールとの連携を統合した専用サービスが登場し、研究支援の実用化が進んでいる。

汎用AIモデル（GPT-5）による研究支援の実績

- ・ 研究者が、GPT-5の持つ豊富な知識や高い推論能力を活用することで、数学、物理、生命科学など幅広い分野で研究支援や新たな科学的成果を得た事例が報告されている

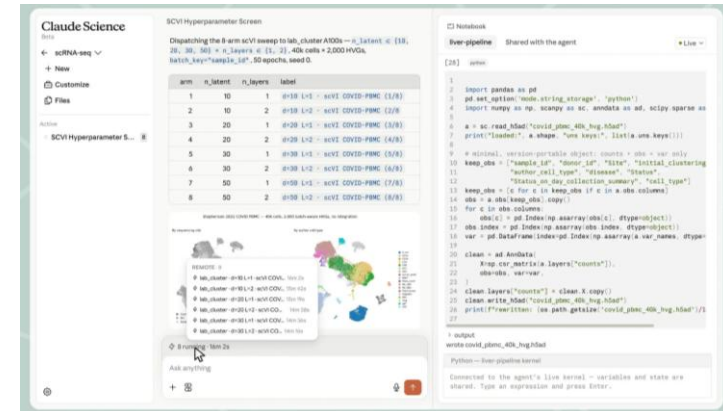
分野	解説
数学	整数論、組合せ論、グラフ理論、確率過程などの分野で、新たな証明・反例・境界値の導出を含む、学術的に新規性のある成果が多数報告されている。
物理・天文学	ブラックホールの対称性、宇宙ひもから生じる重力波、核融合反応が燃料全体へ広がる条件などを対象に、現象を説明する解析式や数理モデルの導出を支援した。
計算機科学・数理最適化	将来の入力が分からない不確実性の高い状況で移動距離や計算コストを抑える問題、勾配降下法、多目的最適化などを対象に、アルゴリズムの性能限界や最適化手法に関する証明・改善を行った。
生命科学	免疫細胞の働きや、がん細胞を攻撃する能力を高める方法を対象とする。GPT-5は、ある物質がT細胞やCAR-T細胞に効果を与える仕組みについて、新しい説明を提示し、その検証につながる追加実験を提案した。

Sébastien Bubeck et al. (OpenAI for Science), “Early science acceleration experiments with GPT-5,” Sections I.3, II.2, II.4, arXiv:2511.16072, 2025年11月20日公開（2026年7月14日アクセス）を元に日本総研作成

研究支援用のAIサービス

Claude Science

- ・ 文献調査、コード実行、データ解析、グラフ・図表作成による可視化等を一つの環境に統合し、研究活動全体を支援
- ・ DNA・RNA・タンパク質など生体分子の解析・構造予測・設計を支援する科学タスク特化型AIが利用可能で、特に生命科学分野の研究に強い



研究データ、解析コード、実行結果を同一環境で確認・編集

[画像出所] Anthropic, “Claude Science, an AI workbench for scientists,” <https://www.anthropic.com/news/claude-science-ai-workbench>, 2026年6月30日公開（2026年7月14日アクセス）

その他サービス

OpenAI Prism	科学的推論、数式・証明の検討、文献参照、LaTeX論文の執筆・共同編集を支援。
Elicit	論文検索、スクリーニング、データ抽出、研究レポート作成を支援

AI for Scienceの進展と事例

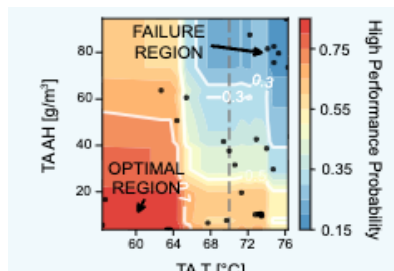
AIによる研究活動の自律化

- AIによる科学研究は、仮説生成・分析・評価・改良を反復し、研究サイクルを自律的に進める段階へ移行しつつある。
- 人間の判断を待たずに反復できるため、研究探索の高速化や探索範囲の拡大が期待される。

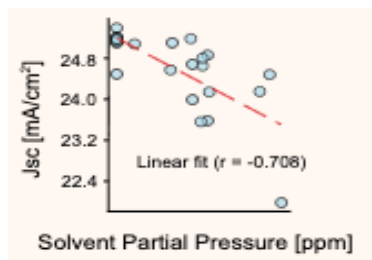
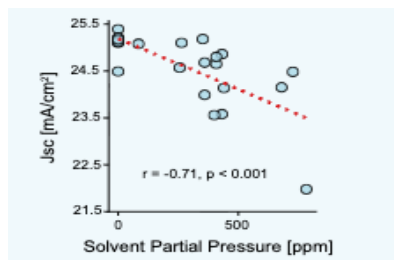
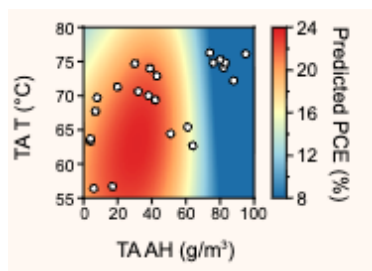
Kosmos

- データと目的を与えると、仮説→検証→文献調査→修正のループを回してレポート作成まで一気通貫でこなせるAIエージェント
- 約12時間実行でき、人間の研究者の約6ヶ月分相当の作業（論文1,500本の調査、4万行のコード実行など）を代替したとされる
- 作成レポートの約80%が正しいとされ、論文の再現や、人間が見逃した新事実の発見を行うなど、実用面でも高い評価を得ている

Kosmosの出力結果



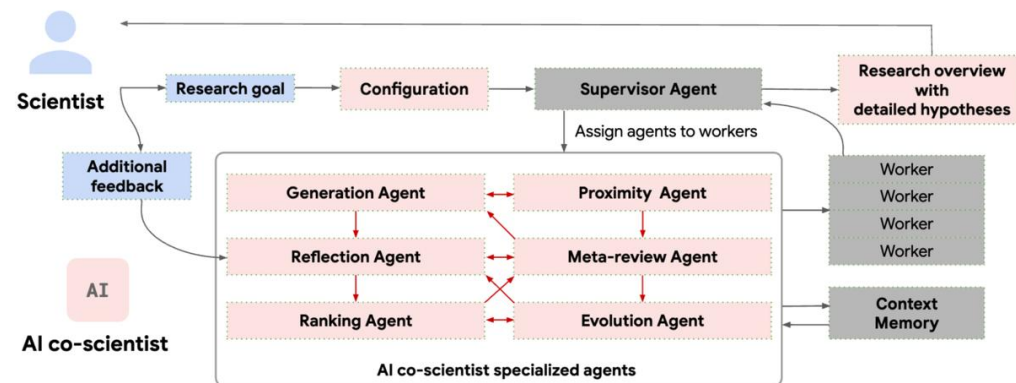
人間の研究者による結果の検証



[画像出所] Ludovico Mitchener et al., "Kosmos: An AI Scientist for Autonomous Discovery,"
<https://arxiv.org/abs/2511.02824>, 2025年11月4日公開（2026年8月7日アクセス）

Google AI Co-Scientist

- 研究目標や制約条件を設定すると、仮説生成→批判・比較→有望な仮説の選択→改良・再生成のループを回し、研究仮説を更新・高度化するAIエージェント
- 人間の研究者は、提示された仮説を確認し、探索の方向や最終的な検証方針を判断したうえで、仮説を確かめるための実験を行う
- 急性骨髄性白血病に対する既存薬転用候補や併用療法候補を提案し、一部は細胞実験で有効性が確認された



生成（Generation）・批判的検討（Reflection）・順位付け（Ranking）・改良（Evolution）・総括（Meta-review）などの複数のAIエージェントを協調させ仮説改善のループを回す

[画像出所] Google Research, "Accelerating scientific breakthroughs with an AI co-scientist,"
<https://research.google/blog/accelerating-scientific-breakthroughs-with-an-ai-co-scientist/> 2025年2月19日公開（2026年7月14日アクセス）

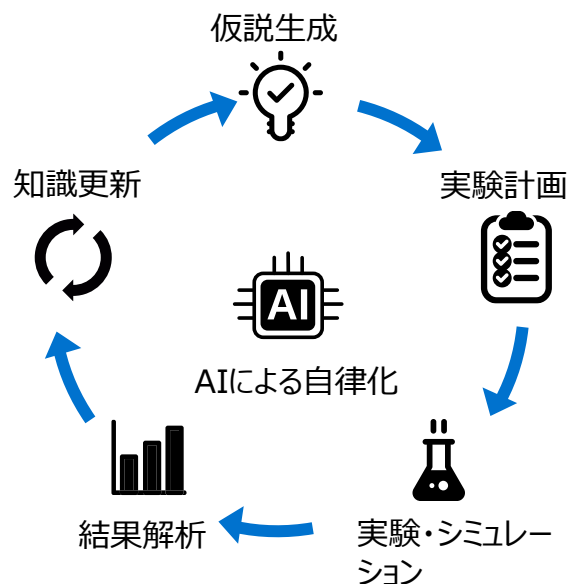
⚠ ただし、KosmosやGoogle AI Co-Scientistでは、物理実験の実行・結果取得の自律化はされていない

AI for Scienceの進展と事例 研究自律化の進展と条件

- AIを実験設備や専門ツールと接続し、仮説生成から実験・結果解析・改良までを自律的に反復する研究が進められている。
- 実験を含む研究の自律化は、データやツールの整備、自動操作できる実験環境が必要なため、一部の領域・タスクから進行している。

実験を含む研究サイクルの自律化

- AI・ロボット・実験装置を接続することで、実験計画・実行・評価を反復し、研究プロセスを自律的に遂行



研究自律化のメリット

- 人手に依存しないので、長時間にわたり実験を継続可能
- 広い探索空間を反復可能
- 研究者を反復作業から解放

自律化が進む条件と先行分野

自律化が進む条件

- AIが利用できるデータ・知識・ツールが整備されている
- AIの実験計画を、実世界または計算環境で実行できる
- 短期間・低コストで反復できる

先行する分野

- 自律化AIの研究は、生命科学・化学・材料科学・物理学・天文学や数学を中心に進展している。

領域	タスク	研究事例数	自動化プロセス(*)	
			一部	全部
生命科学	ゲノム解析	18	11	7
	タンパク質科学・工学	2	1	1
	創薬および治療法開発	12	7	5
化学	有機合成と反応最適化	7	1	6
	生成化学と分子設計	5	1	4
	計算化学と量子化学	4	4	0
材料科学	新規材料の設計と発見	8	2	6
	シミュレーションと特性評価の自動化	4	4	0
物理学・天文学	量子コンピューティング	1	1	0
	天文学と宇宙論	5	4	1
	計算力学と流体力学	5	4	1

Jiaqi Wei et al. "From AI for Science to Agentic Science: A Survey on Autonomous Scientific Discovery", arXiv preprint arXiv:2508.14111, <https://arxiv.org/abs/2508.14111>, 2025年8月18日公開 (2026年8月14日アクセス)
Table 8, 10, 12, 14を元に日本総研作成

* 一部：人間が設定した部分課題について、研究工程の一部を自律実行
全部：仮説生成から検証・改良まで、研究サイクル全体を自律的に反復

AI for Scienceの進展と事例

創薬・生命科学分野における研究自律化

- 創薬・生命科学分野では、豊富な研究データや解析ツールを活用し、**創薬初期の探索・設計・解析**を中心に自律化が進展している。
- 動物実験や臨床試験、長期安全性評価などの創薬後期が、**実用化に向けたボトルネック**となる。

創薬・生命科学分野とAI

- ・生命科学・創薬分野では、AIが利用できる研究データや解析ツールが整備されているほか、創薬初期の細胞・分子レベルでは実験の自動化も進めやすい
- ・標的探索、薬剤候補探索、生体分子設計、データ解析を中心に、自律化の大きな進展が期待されている
- ・一方、動物実験、臨床試験、長期安全性評価などの創薬後期では、実験サイクルの自律化は難しい
- ・このことは、AIが生み出した研究成果を治療薬として社会に届けるうえで今後もボトルネックになると考えられる

- 進展が期待されるタスク**
- ・疾患メカニズム・創薬標的の探索
 - ・薬剤候補探索・薬剤再利用
 - ・single-cell・オミクス・作用機序解析
 - ・低分子・タンパク質・抗体・ナノボディ設計
- 自律化が難しいタスク**
- ・動物実験・生体内での薬効評価
 - ・臨床試験・長期安全性評価

研究初期

**実用化に近いほど
自律化が難しい**

実用化

代表事例

事例	自律化方式	主な成果
SpatialAgent	研究目的を入力→パネル設計（測定遺伝子選出）→細胞の種類や組織内の領域を特定→結果分析→細胞間相互作用に関する仮説生成	約30分で遺伝子選出を完了。既存手法比で細胞型の識別精度を6.0～19.1%向上
The Virtual Lab	AIが議論して研究方針を決定→ツールを組み合わせたパイプライン設計→有望候補を生成・評価→変異候補を生成・評価し、有望候補を選定	SARS-CoV-2の複数の変異株に結合する機能性ナノボディを実験的に確認
Sparks	仮説生成→配列設計→構造予測→物性予測→結果の批判・修正→得られた結果を一般化→レポートを生成	タンパク質設計に関する、未知の構造・力学特性を発見
Robin	文献検索→治療仮説・薬剤候補を選定→人間が細胞実験を実施→AIが実験データを処理・解釈→次の候補やRNA-seq実験を提案	既存薬の別用途での再利用を発見

SpatialAgent: Wang, H. et al., *SpatialAgent: An autonomous AI agent for spatial biology*, <https://doi.org/10.1101/2025.04.03.646459>, 2025年4月6日公開（2026年8月5日アクセス）

The Virtual Lab: Swanson, K. et al., *The Virtual Lab of AI agents designs new SARS-CoV-2 nanobodies*, <https://doi.org/10.1038/s41586-025-09442-9>, 2025年7月29日公開（2026年8月5日アクセス）

Sparks: Ghafarollahi, A. & Buehler, M. J., *Sparks: Multi-Agent Artificial Intelligence Model Discovers Protein Design Principles*, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2504.19017>, 2025年4月26日公開（2026年8月5日アクセス）

Robin: Ghareeb, A. E. et al., *A multi-agent system for automating scientific discovery*, <https://doi.org/10.1038/s41586-026-10652-y>, 2026年5月19日公開（2026年8月5日アクセス）を元に日本総研作成

AI for Scienceの進展と事例

化学・材料科学分野における研究自律化

- 化学・材料科学分野では、**ロボットによる自動実験**を反復し、有望な候補を絞り込む研究で自律化が進展している。
- ロボット実験系が特定の材料・操作に特化しており、**AIの汎用的な知識を異なる実験系へ展開しにくい**。

化学・材料科学分野とAI

- ・ 化学・材料科学では、分子・組成・構造・合成条件の組み合わせが膨大であり、生成AIの発展以前から実験を含む研究の自律化が進められてきた
- ・ 物性計算、反応予測などのデジタルツールに加え、分注・混合・加熱・測定などの定型実験がロボットで実行しやすい
- ・ 一方、現在の自律型ラボは特定の材料系・探索空間に特化したものが多く、異なる材料・実験系への展開や複数装置・工程をまたぐ自律化が課題
- ・ さらに、実用化に向けた量産可能な製造条件の確立や安全性評価など、実験の規模や評価項目が広がるほど自律化は難しくなる

進展が期待されるタスク

- ・ 反応条件・触媒の探索
- ・ 分子・材料候補の設計
- ・ 組成・製造条件の最適化
- ・ 自動合成・物性評価

自律化が難しいタスク

- ・ 複雑・非定型な実験操作
- ・ 大規模化や長期安全性の確認
- ・ 異なる材料・反応系への一般化

研究初期

 研究対象・実験工程
が広がるほど自律化
が難しい

実用化

代表事例

事例	自律化方式	主な成果
トランジスタ材料の発見	方針を入力→実験計画→ロボットによる作製・測定→結果解析→次の実験計画→（反復）→データの可視化→フィードバックをもとに探索方針を修正	トランジスタ材料としての性能を150%向上。 電荷を蓄える性能を高める材料構造を特定
A-lab GPSS	LLMとベイズ最適化を組み合わせ仮説生成→実験条件を提案→ロボットが実験→結果をLLMへ戻す→次の実験	探索を重ねることによりリチウム電池向け有望材料の発見率を約4倍に向上
ChemCrow	AIが課題を分解→専門ツールを選択・実行→合成経路と実験手順を立案→自動合成→評価して再立案	新規色素候補の発見を支援

トランジスタ材料の発見: Dai, Y. et al., *Adaptive AI decision interface for autonomous electronic material discovery*, <https://doi.org/10.1038/s44286-025-00318-3>, 2025年12月18日公開（2026年8月5日アクセス）
 A-lab GPSS: Fei, Y. et al., *Agentic LLM Reasoning in a Self-Driving Laboratory for Air-Sensitive Lithium Halide Spinel Conductors*, <https://arxiv.org/abs/2604.11957>, 2026年4月13日公開（2026年8月5日アクセス） *プレプリント
 ChemCrow: Bran, A. M. et al., *Augmenting large language models with chemistry tools*, <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00832-8>, 2024年5月8日公開（2026年8月5日アクセス）を元に日本総研作成

AI for Scienceの進展と事例

計算科学・物理学分野における研究自律化

- 計算科学・物理学・天文学では、シミュレーションや観測・実験の反復を中心に自律化が進展している。
- 一方、複雑な装置の構築・調整や、未知現象の物理的解釈には人間研究者の関与が残る。

計算科学・物理学分野とAI

- ・ 物理法則や現象を数式で記述し、シミュレーションできるため、仮説や条件を計算機上で反復的に検証しやすい
- ・ 流体解析や量子計算などでは、計算条件の設定から実行・結果解析までの自動化が進んでいる
- ・ 天文観測や光学・量子実験でも、AIと望遠鏡・実験装置を接続し、観測・測定・解析・条件更新を反復する取り組みが進展している
- ・ 一方、複雑な実験装置の構築・調整や、予期しない現象への対応、結果の物理的解釈には、人間研究者の関与が残る

進展が期待されるタスク

- ・ 数値シミュレーションによる物理現象の解析
- ・ 天体・物理現象の観測とデータ解析
- ・ 実験条件・装置パラメータの探索
- ・ 量子・光学実験の自動実行

自律化が難しいタスク

- ・ 複雑な実験装置の構築・利用
 - ・ 例：量子プロセッサやレーザー・検出器
- ・ 結果の物理的解釈
 - ・ 例：環境・設備由来のノイズの切り分け

計算・解析中心

実設備への依存が増加

実環境・実設備中心

代表事例

事例	自律化方式	主な成果
StarWhisper	観測対象・方針を入力→観測リストを生成→望遠鏡へ観測指示を送信→撮影画像をリアルタイム解析→追観測案を作成	10台の望遠鏡を自律的に操作し超新星を探索
OpenFOAMGPT 2.0	自然言語の解析課題を分解→計算条件・設定ファイルを生成→流体シミュレーションを実行→結果解析	450件超の流体シミュレーションで100%の成功率・再現性を達成
K-Agents	実験手順を状態遷移として計画→量子プロセッサを制御→結果解析→実験操作決定	数時間の自律実験で、人間研究者と同等水準で量子もつれ状態を生成・評価
自律型ナノフォトニクス実験基盤	実験条件選択→光学実験→測定→モデル更新→再実験	半導体メタサーフェスの発光方向制御に関する原理を探索

StarWhisper: Wang, C. et al., *StarWhisper Telescope: an AI framework for automating end-to-end astronomical observations*, <https://doi.org/10.1038/s44172-025-00520-4>, 2025年11月6日公開 (2026年8月5日アクセス)
OpenFOAMGPT: Feng, J., Xu, R. & Chu, X., *OpenFOAMGPT 2.0: end-to-end, trustworthy automation for computational fluid dynamics*, <https://arxiv.org/abs/2504.19338>, 2025年4月27日公開 (2026年8月5日アクセス) *プレプリント
K-Agents: Cao, S. et al., *Automating quantum computing laboratory experiments with an agent-based AI framework*, <https://doi.org/10.1016/j.j.patter.2025.101372>, 2025年9月23日公開 (2026年8月5日アクセス)
自律型ナノフォトニクス実験基盤: Desai, S. et al., *Self-driving lab discovers principles for steering spontaneous emission beyond conventional Fourier optics*, <https://doi.org/10.1038/s41467-025-66916-0>, 2025年12月9日公開 (2026年8月5日アクセス) を元に日本総研作成

AI for Scienceの進展と事例

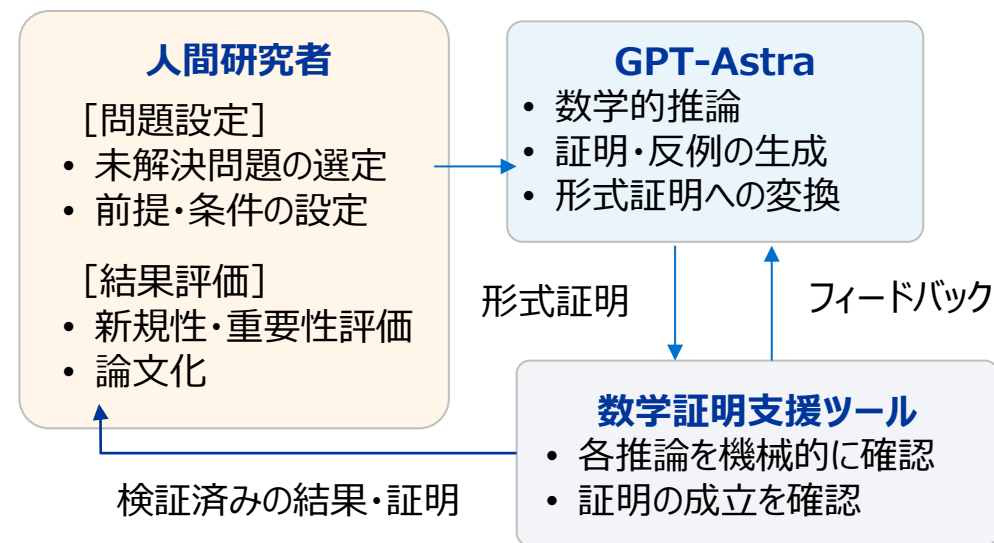
数学分野における研究自律化

- 数学では推論から検証までを計算機上で完結しやすく、AIによる自律化が進みやすい。
- 一方、重要な問いの設定や成果の難易度・新規性の評価、導出の妥当性の判断には、引き続き専門家が必要となる。

数学分野とAI

- 数学分野では、2025年時点では研究者の支援役（→P.10）だったAIが、**問題を解く上で中心的な役割を担いつつある**
- その代表例として、OpenAIの次期主要モデルGPT-Astraによる数学・計算科学の未解決問題に対する新たな証明・反例・境界値の導出が挙げられる（2026年8月1日に発表）
- ただし、独立した**査読や各分野の専門家による検証は今後必要である**
- なお発表された10件の成果は、合計約2,000ドルのAPI費用で得られた

人間とAIの役割分担



GPT-Astraによる数学的発見（10件中2件）

成果	内容
平面単位距離問題の予想を反証	- 多数の点を置いたとき、同じ距離にある点の組をどこまで増やせるか 80年間広く信じられてきた予想を反証。 - 専門家から「AI数学の画期的成果」「一流誌級」と評価
高次元球充填	- 高次元空間における球充填密度の理論上限を更新 - 幾何学の古典的問題で、情報通信にも関連

AI for Scienceの進展と事例

AIによるAI開発の自律化に向けた進展

- AIモデルの開発において、コード作成からテスト・評価までAIが担う範囲が拡大し、AI開発の自律化に向けた動きが進んでいる。
- その結果、開発速度が加速する一方で、人間による監督や安全性評価が追いつかなくなるリスクが高まっている。

AIによるAIの自律的開発

- 先端AI企業では、AIモデルの実装・評価・実験など、AI開発の各工程でAI活用が拡大している。
- AIがコード作成や実験の反復を担い、人間は方針設定・レビューを担当

Anthropic

 マージコードの80%超をClaudeが作成(*1)
 *AIモデル開発以外のコードも含む

OpenAI

 GPT-5.6 Solが自身の**モデル改善のため実験を自ら計画・実行**(*2)

自律的なAIの進歩に伴うリスク

- Anthropicは、AI開発自律化・加速がもたらすリスクを認識し、**能力監視や開発・提供の制限などの対策**を講じている
- 実際に、高度なサイバー能力を持つClaude Mythosは、一般公開されず、利用者を限定して提供された
- 今後は、AIによるAI開発の監督と安全確保に関する国際的な共通ルールを整備することが重要である

Anthropicが指摘するリスク

AIが多数の実験や変更を高速に行い、人間がその内容を十分に監督できなくなる

AIがコードや評価結果を密かに操作し、開発組織に自身の安全性を誤認させる

サイバー攻撃や生物・化学分野などの危険な能力が急速に高まり、その進展を人間が監督することが難しくなる

 Anthropic"Recursive self-improvement" <https://www.anthropic.com/institute/recursive-self-improvement> (2026年8月4日アクセス) を元に日本総研作成

Anthropicが導入している対策

AIがAI研究開発を大幅に加速できる能力水準を監視し、必要に応じて開発停止を含む措置を検討

AIが監視を回避して不正な操作を行う可能性や、危険な目標を持つ可能性を評価

内部監視とアクセス制御により不正な行動を検知・制限

サイバー攻撃、生物・化学兵器の製造に関する能力を監視

 Anthropic"Responsible Scaling Policy" <https://www.anthropic.com/responsible-scaling-policy>; Anthropic, "Claude Fable 5 and Claude Mythos 5" <https://www.anthropic.com/news/claude-fable-5-mythos-5> (2026年8月4日アクセス) を元に日本総研作成

 *1 Anthropic Institute, "When AI builds itself," <https://www.anthropic.com/institute/recursive-self-improvement> (2026年8月4日アクセス)

 *2 OpenAI, "How GPT-5.6 fuses frontier intelligence with frontier efficiency," <https://openai.com/index/gpt-5-6-frontier-intelligence-efficiency/> (2026年8月13日アクセス)

AI for Scienceを支える基盤と課題

AIの研究能力に残る課題

- 一方で、AIによる自律的研究能力の限界を指摘する声もある。
- Songら^(*1)は、一般的な科学Q&Aベンチマークで高い性能を示すLLMでも、**研究プロジェクト全体を遂行するタスクでは十分な性能を発揮できない場合があることを示した。**
- 汎用AIの規模・推論能力の向上だけでなく、問題設定・仮説生成、科学的推論、ツール利用など、研究の自律化に必要な能力を重点的に強化する必要がある。

指摘される課題

研究対象の構造・関係性の把握

構造-物性関係など、現象を捉えるための個別知識・推論が不十分なタスクがある

個別タスクの性能が研究全体の成功につながらない

個別問題を解けても、複数工程をつなぐと一部の弱点や誤りが後続工程に伝播する
モデル規模や推論量を増やしても、科学的発見能力の改善が限定的な場合がある

多段階計画の反復的な修正

これまでの探索結果との整合性を保ちながら、計画を更新しつづけることが難しい

研究タスクごとの能力差

同じ分野でもタスクによって性能差が大きく、**異なる最先端LLMでも同じ問題・研究タスクで失敗する傾向**

今後AIに必要な強化

多様なデータでの学習

事前学習データの情報源を多様化し、特定のデータ分布に由来する共通の弱点を抑制

問題設定・仮説生成能力の強化

単純なモデル規模・推論量の拡大だけでなく、問題の定式化、仮説生成・改善、不完全な証拠の解釈など、科学研究固有の能力を重点的に学習

科学ツール利用能力の強化

シミュレーター、計算ライブラリ等を学習段階から組み込み、ツール実行→失敗の修正→研究手順の改善まで行える能力を強化

科学的推論に特化した学習

数学・コーディング向けの推論強化をそのまま転用するのではなく、科学的発見に特化した強化学習・ポストトレーニングを開発

^{*1} Song, Z. et al., "Evaluating Large Language Models in Scientific Discovery," arXiv:2512.15567, 2025, <https://arxiv.org/abs/2512.15567> (2026年8月5日アクセス) を元に日本総研作成

AI for Scienceを支える基盤と課題

研究環境の整備

- AI for Scienceを今後より進展させるためには、データのAI-Ready化*と、AIや実験設備を利用するための計算資源の*備が必要である。

*研究データや実験環境を、AIが自律的に利用できる形に整備すること

課題	概要	解決に向けた取り組み
多様なデータの取り扱い	画像、数値、テキストのみならず、遺伝子配列、分子構造、3Dモデルなど、従来のマルチモーダルAIが対応していなかった科学研究特有のデータ形式への対応が求められる	- 科学タスク特化型AIを利用可能な統合環境 例: Claude Science (→P.10) - LLMと遺伝子配列や分子構造を同じ埋め込み空間で理解できるモデルの開発
データの標準化・基盤	研究分野や機関ごとにデータ形式が異なり、データの共有・再利用が困難。大規模データセット構築のため、データ共有の促進と安全な活用基盤が必要となる	- 国・研究機関が共通DB、研究データ基盤、分野横断のデータ連携環境を整備し、AIが利用しやすい形でデータを流通させる。(→P.21) - 研究データのFAIR化（データの共有・再利用を可能とする標準化）を推進する
AI計算インフラ	困難な課題への対応には、生成AIを長時間使用する必要があり、これには膨大な計算資源が必要となる	国・研究機関・企業がGPU/HPC、科学基盤モデル、モデル利用環境を整備し、個別研究室では持てない大規模基盤を提供 (→P.21)
実験環境	物理的な作業を伴う研究、高リスク・長周期・高コスト実験は自律化が困難	- ロボティクス技術、フィジカルAIが進歩している - 科学タスク特化型AI (→P.9) やサロゲートモデル*によって、これらの実験を代替 *高コストな実験・シミュレーションの入出力関係を学習し、その結果を高速に近似予測するモデル

AI for Scienceを支える基盤と課題

研究成果の社会実装に向けて

- AI for Scienceが進展すると、発見候補の増加に対して、**検証が追いつかなくなるリスク**が高まる。
- 科学的知見として積み上げるには、第三者検証・標準化プロトコル・追試優先順位付けを含む**検証の仕組みの整備**が重要。

課題	概要	解決に向けた取り組み
低品質な研究の量産	- 生成AIのハルシネーションにより、AIの発見が本質的に有効な発見か、もっともらしい捏造された発見かの判別が困難になる可能性がある - 実際に、低品質論文の急増が起こっている^(*1) ^(*2)	- AI利用の開示、AI画像・引用・査読利用のルール化 - Springer Natureは、AIを著者と認めず、生成AI画像を原則認めず、査読者が未公開原稿を生成AIにアップロードしないよう求めている^(*3) - arXivでは、幻覚引用やLLMのメタコメントなど「著者がLLM出力を確認していない明白な証拠」がある投稿に対し、1年間の投稿禁止などの措置がありうると報じられている^(*4)
科学的推論の透明性	科学的発見には、正しい結論だけでなく、検証可能性も求められる	AIによる科学的推論や実験の履歴・結果を記録し、研究プロセス全体を追跡・検証できる仕組みの整備が必要
科学的発見の検証	- 生成AIの確率的な挙動により、発見の再現性が低下する可能性がある - AIが生成する仮説が急増すると、検証が追いつかず科学コミュニティの健全性が損なわれる懸念がある	- 米国のARPA-H（Advanced Research Projects Agency for Health）は、AIが標準的な実験手順を作成し、第三者の研究機関が同じ手順で検証する仕組みを構想している^(*5) - 今後は生命科学分野以外においても、AIを活用した実験・検証の標準化・効率化が期待される
倫理的・社会的課題	AIが非倫理的な研究、人間の生命に深刻な影響を及ぼす研究（危険な化合物の発見など）を自律的に推進するリスクがあり、このリスクを低減するためのガバナンスやAIアライメント技術の発展が必要	- OpenAI, Anthropic, Googleは、モデルが危険な化合物や病原体の設計や実験を支援できるかを事前に評価し、危険な研究目的の察知を実施している - 一方で、未知の研究に対してどの程度その危険性の検知ができるかについて、評価方法も含めて未知数

*1 Katharine Sanderson, "Science's fake-paper problem: high-profile effort will tackle paper mills", <https://www.nature.com/articles/d41586-024-00159-9>, 2024年1月19日公開（2026年7月24日アクセス）

*2 Miryam Naddaf and Elizabeth Quill, "Hallucinated citations are polluting the scientific literature. What can be done?", <https://www.nature.com/articles/d41586-026-00969-z>, 2026年4月1日公開（2026年7月24日アクセス）

*3 Springer Nature, "AI for our communities", <https://group.springernature.com/gp/group/ai/ai-guidance-for-our-researchers-and-communities>（2026年7月24日アクセス）

*4 Dalmeet Singh Chawla, "Researchers who use hallucinated references to face arXiv ban", <https://www.nature.com/articles/d41586-026-01595-5>, 2026年5月19日公開（2026年7月24日アクセス）

*5 Advanced Research Projects Agency for Health (ARPA-H), "ARPA-H launches new program to deliver rigorous, gold-standard research faster", <https://arpa-h.gov/news-and-events/arpa-h-launches-new-program-deliver-rigorous-gold-standard-research-faster>, 2026年5月5日公開（2026年7月24日アクセス）

AI for Scienceを支える基盤と課題

AI for Science推進に向けた各国の取り組み

- 各国はAI for Scienceを重要テーマと位置づけ、**データ・計算基盤・AIモデル・実験環境をつなぐ研究基盤**の整備を進めている。
- 日本も具体的な取り組みを進めているが、短中期的にはAI for Scienceの拡大に対する計算資源の確保が課題。

国・地域	中核施策/ 主体	研究基盤	展開規模・進捗	各国の特色
米国 	Genesis Mission / 米国エネルギー省	データ: 17国立研究所の実験・観測データを、AIで利用可能な形に整備 AI: 民間企業の先端AIモデルや研究ツールを国立研究所の研究環境に接続 計算: GPUを1万基搭載したスパコンを2026年提供予定、GPU10万基のスパコンも整備中	17国立研究所と企業・非営利団体等24組織が参加。 (OpenAI、Google、Anthropic、Microsoft、Amazon Web Services、NVIDIA、AMD等) 大規模GPU・計算資源を整備し、エネルギー・材料・生命科学等でプロジェクトを展開 ロボット実験を含む自律研究も推進	国立研究所の研究資源と民間企業のAI技術を結集
中国 	ScienceOne 100 / 中国科学院	データ: 約1.7億件の科学技術文献や多様な科学データを検索・分析できる環境を整備 AI: 8分野の専門モデルを開発し、2,000超の研究ツールを提供 計算: 中国科学院傘下の研究機関で利用できる共通AI環境を整備	50超の研究機関、100超の研究シナリオへ展開済み。 複数分野で利用を開始し、共通AI基盤の適用範囲を拡大 自律実験よりも研究支援AIの大規模展開が先行	政府系研究機関が開発した共通AI基盤を、多数の研究機関・分野へ迅速に横展開
EU 	RAISE (Resource for AI Science in Europe) / 欧州委員会	データ: 域内の研究データを共有・再利用できる環境を整備 AI: 科学・産業向けAIモデルの開発環境と専門支援サービスを提供 計算: AI向けスーパーコンピューターを備えた共同利用拠点を19ヶ所、地域接続拠点を13ヶ所運用	RAISEの試行段階に最大6億ユーロを投入。AI向け共同利用拠点・地域接続拠点には、EUと参加国が26億ユーロ超を拠出 現時点では、域内に分散するデータ・計算資源・人材を共同利用する 基盤整備が中心	EU各国に分散する研究データ・計算資源・人材を、域内の共通基盤としてネットワーク化
日本 	文部科学省等	データ: 全国の大学・研究機関が研究データを共有する基盤を、2030年度までに現状の5倍へ拡充 AI: 科学向けAIモデル・研究支援ツール。研究データや実験設備との連携を推進 計算: 共用計算資源を2030年度までに現状の10倍以上に拡充予定	AI駆動型研究開発に、令和7年度補正予算約490億円、令和8年度予算約180億円を計上 研究データ・計算資源・AIモデル・研究設備を段階的に整備し、自動・自律実験に対応する研究環境の整備を推進	既存の学術・研究基盤を活用し、段階的に自律化

米国：米国エネルギー省（DOE）“Energy Department Launches ‘Genesis Mission’ to Transform American Science and Innovation Through the AI Computing Revolution”, <https://www.energy.gov/articles/energy-department-launches-genesis-mission-transform-american-science-and-innovation>, 2025年11月24日公開（2026年6月24日アクセス）、“Energy Department Announces New Partnership with NVIDIA and Oracle to Build Largest DOE AI Supercomputer”, <https://www.energy.gov/articles/energy-department-announces-new-partnership-nvidia-and-oracle-build-largest-doe-ai>, 2025年10月28日公開（2026年6月24日アクセス）、“Energy Department Advances Investments in AI for Science”, <https://www.energy.gov/articles/energy-department-advances-investments-ai-science>, 2025年12月10日公開（2026年6月24日アクセス） 中国：中国科学院（CAS）“Chinese Academy of Sciences Unveils AI Model System for Scientific Research”, https://english.cas.cn/newsroom/cas-in-media/202604/t20260429_1158251.shtml, 2026年4月29日公開（2026年6月24日アクセス） EU：欧州委員会 “European Strategy for Artificial Intelligence in Science”, https://research-and-innovation.ec.europa.eu/strategy/strategy-research-and-innovation-digital-future/european-ai-science-strategy_en, 2025年10月8日公開（2026年6月24日アクセス）、“AI Factories”, <https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/policies/ai-factories>, 2026年4月23日公開（2026年6月24日アクセス） 日本：文部科学省 “AI for Scienceの推進に向けた基本的な戦略方針”, https://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/077/aifors_strategy.html, 2026年3月31日公開（2026年6月24日アクセス）を元に日本総研作成

AI for Scienceの未来

人間の研究者の重要な役割

- AI for Scienceの活用は広がる一方で課題も残り、それに伴って人間研究者の役割も変化していく
- 人間の研究者が主体となり、AIの利点を活用することによって、負担軽減や効率化、研究の高度化を行っていくことが重要となる。

	AIの利点	AIの課題	人間の研究者の重要な役割
仮説の生成	派生的な仮説の大量生成 既存の重要な研究から大量の派生的な仮説を生成できる	重要でない仮説も生成する 科学的に重要でない仮説も生成し、大胆な主張をしてしまうことがある	科学的に意義深い問いや仮説の探求
仮説の検証・実験	大量のパターンの検証 人間が検証しきれない大量のパターンを網羅的に検証できる	再現性の欠如 AIの確率的な挙動により、再現性がなくなる可能性がある。科学研究にとって再現性の欠如は致命的	再現性の確認・検証
	反復作業の高速化 実験や検証に伴って発生する単純な反復作業を高速化する可能性が期待される	正確な作業遂行 長期ステップの作業など、AIは人間と同じように作業できないことも多い	実験・検証結果の正確性確認
結果の評価	多角的な評価 入力データを基にして統計・定量的な側面を含む、多角的な観点からの評価を支援できる	結果の解釈 科学的に重要か否かの判断ができず、解釈が難解な結果や間違った説明を出力することもある	結果の解釈と意味づけ
知識・思考力	膨大な知識の活用 膨大な知識を学習しており、特定分野に限らずに人間の入力に従って様々な知識を引き出せる	創造性の発揮 従来の考え方と異なる飛躍的な新規アイデアの創出などは難しい	独創的なアイデアの活用

AI for Scienceの未来

AI for Scienceが変える科学的発見の未来

- AI for Scienceは、条件が整った分野から研究が加速する一方、検証・安全性などの課題も残る。
- 研究者・政府・企業による基盤整備や検証に加え、我々も発見と実用化のギャップを理解し、安全性の確保を求めていく必要がある。

AIが科学研究にもたらすメリット

- ・ 研究プロセスを代替し、研究者を定型・反復作業から解放
- ・ 高度な知識・推論による難易度の高い仮説・解法の探索
- ・ 仮説生成→実験→分析を反復し、探索を高速化・広範化

AI for Scienceが進展する条件

- ・ データ・研究ツールの整備
- ・ AIが実験・シミュレーションを実行可能な環境
- ・ 実験・検証に要する時間・コストが手頃

先行する領域

条件を満たす分野・タスクから AI for Scienceが先行する

創薬・生命科学

化学・材料科学

物理学・計算科学

数学

AIによるAI開発

AI for Scienceの進展に伴う課題

- ・ 発見の高速化に対して妥当性・安全性の検証が不足
- ・ 実用化に向けた研究段階は自律化困難
- ・ データ・実験環境の整備が遅れている分野の研究

人間の研究者の役割

- ・ 意義ある問い・独創的アイデア
- ・ 正確性・再現性の検証
- ・ 結果の解釈・意味づけ

政府・企業・研究機関の役割

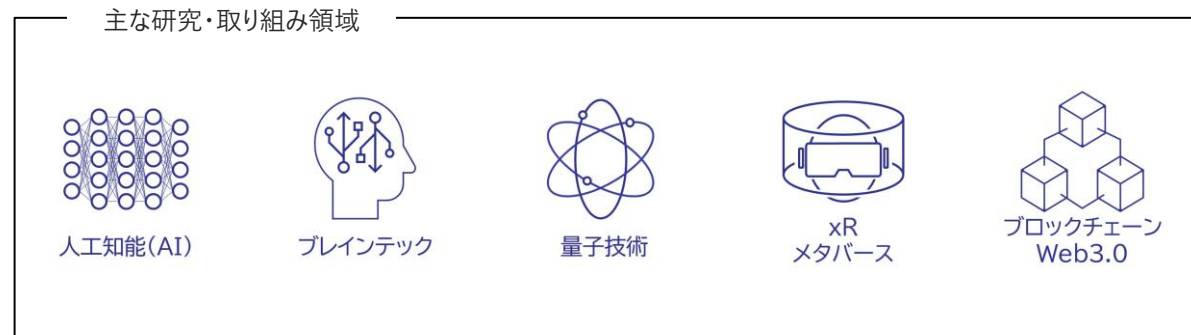
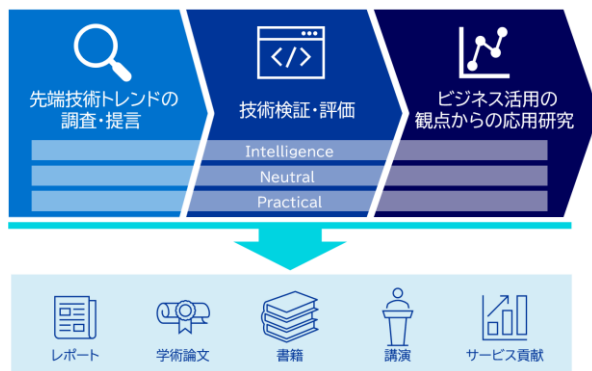
- ・ 計算資源の確保
- ・ データ基盤・実験環境の整備
- ・ 安全性・倫理面の検証体制を構築

市民の役割

- ・ 発見と実用化のギャップの理解
- ・ AI開発・利用における安全性・倫理性の確保の要求

先端技術ラボのご紹介

先端技術を活用したITサービスの創出に向けた技術の目利き役として、
 「先端技術トレンドの調査・提言」、「技術検証・評価」、「ビジネス活用の観点からの応用研究」に取り組んでいます。



当社ホームページの [特集サイト](#) では、IT分野における先端技術の調査レポート、及びメンバーのプロフィール詳細がご覧いただけます。
 本レポート執筆者への取材や講演などに関するご相談は、当社ホームページの [お問い合わせフォーム](#) よりご連絡ください。

株式会社日本総合研究所

日本総研は、シンクタンク・コンサルティング・ITソリューションの3つの機能を有するSMBCグループの総合情報サービス企業です。

東京本社 〒141-0022 東京都品川区東五反田2丁目18番1号 大崎フォレストビルディング

大阪本社 〒550-0001 大阪市西区土佐堀2丁目2番4号



日本総研

The Japan Research Institute, Limited